

**А. В. Маркидонов\***

Кузбасский государственный технический университет им. Т. Ф. Горбачева

г. Новокузнецк

\*markidonov\_artem@mail.ru

## УПРУГИЕ ВОЛНЫ, ГЕНЕРИРУЕМЫЕ СКОПЛЕНИЯМИ МЕЖУЗЕЛЬНЫХ АТОМОВ ПРИ ДВИЖЕНИИ

Методом молекулярной динамики исследуются процессы торможения мигрирующих множественных межузельных атомов, образующих комплекс краудионов. Актуальность исследования обусловлена тем, что подобные дефектные образования могут являться объектами, обеспечивающими сверхглубокий перенос вещества, наблюдающийся в результате радиационного воздействия на твердое тело, и могут рассматриваться в рамках некоторых моделей эффекта дального действия.

*Ключевые слова:* краудион, фонон, температура, кристалл, эффект дального действия, метод молекулярной динамики

**A. V. Markidonov**

## ELASTIC WAVES GENERATED BY CLUSTERS OF INTERSTITIAL ATOMS IN MOTION

Molecular dynamics investigated braking process of migrating multiple interstitial atoms forming the complex crowdions. The relevance of the study due to the fact that such defect formation can be subjects, providing ultra-deep transfer of the substance, which is observed as a result of radiation exposure to the solid, and can be seen in some long-range effect models.

*Keywords:* crowdion, phonon, temperature, crystal, long-range effect, the method of molecular dynamics

Эффект дального действия заключается в изменении структуры и свойств твердых тел на глубинах, значительно превышающих область первичного выделения энергии, при взаимодействии энергетических потоков с поверхностью твердых тел. Теоретические попытки объяснения эффекта дального действия свелись к созданию различных моделей, одна из которых получила название ударной [1]. Данная модель базируется на представлениях о создаваемых плотными каскадами соударений упругих волнах, которые либо непосредственно перемещают точечные дефекты вглубь материала, либо могут вызывать возбуждение скоплений точечных

дефектов и уход их на внутренние и внешние стоки. Существует еще одна схожая модель, предложенная в работе [2], авторы которой после детального анализа экспериментальных данных выдвигают две гипотезы образования дефектов на больших глубинах: либо перенос самих дефектов вглубь образца за счет различных механизмов взаимодействия, либо перенос энергии в виде упругих колебаний на большие расстояния и последующее образование дефектов за счет перенесенной туда энергии, которая, локализуясь на больших глубинах, инициирует процессы дефектообразования. Таким образом, придерживаясь второй гипотезы, можно предположить, что энергия, перенесенная на значительные глубины в виде потенциальной энергии дефекта, может трансформироваться у противоположной поверхности образца или у границы зерен в энергию упругой волны, которая способна вызвать образование дефектов у поверхности. В соответствии с этими предположениями поверхность может являться источником точечных дефектов. Возможно, и другие протяженные дефекты также являются источником вторичных точечных дефектов.

Для уточнения описанных выше моделей требуется выявить дефекты кристаллической структуры, являющиеся потенциальными переносчиками энергии, которые могут мигрировать на значительные расстояния под воздействием упругих волн в твердом теле, подвергнутому облучению и инициировать образование вторичных волн. Актуальность решения данной задачи обусловлено тем, что на сегодняшний день отсутствует полное понимание эффекта дальнего действия. На роль таких несовершенств, требования к которым описаны выше, по-видимому, могут претендовать множественные межузельные атомы, образующие краудинные комплексы, исследование которых было выполнено авторами в работах [3-6]. Целью данной работы является выявление механизмов диссипации рассматриваемых дефектных образований, что позволит в дальнейшем спрогнозировать процесс их возможной миграции.

Рассматриваемые в работе процессы отличаются высокой скоростью протекания, что затрудняет прямые наблюдения. Поэтому наиболее рациональным видится использование методов компьютерного моделирования. В качестве метода компьютерного моделирования был выбран метод молекулярной динамики – что он позволяет проводить эксперименты с заданными скоростями атомов и описывать динамику исследуемых процессов в реальном времени. Исследование проводилось с помощью авторской разработки [7], при этом использовалась расчетная ячейка, имитирующая трехмерный кристаллит алюминия, состоящая из 30 000 атомов. Поверхностные эффекты исключались использованием периодических граничных условий. Взаимодействие между атомами описывалось с помощью парного потенциала Морзе. Температура расчетной ячейки задавалась через начальные скорости атомов в

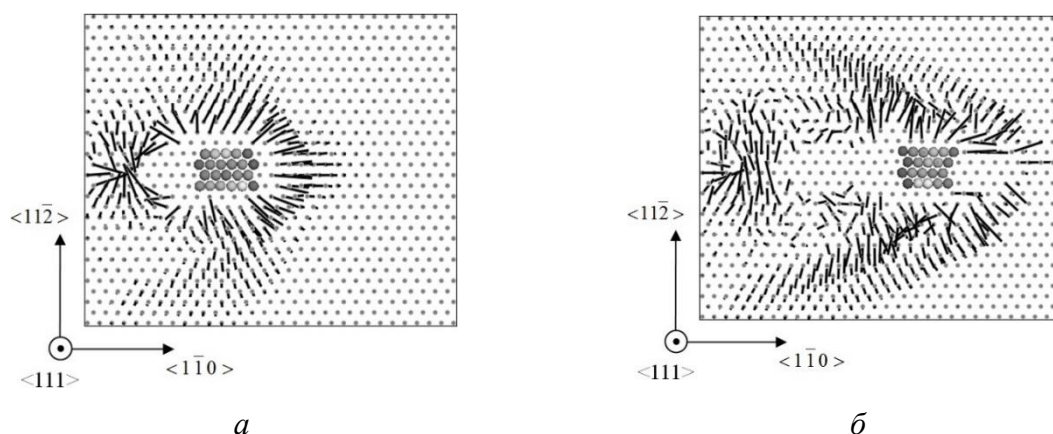
соответствии с распределением Максвелла. Направление скоростей задавалось случайно, но с условием, что суммарный импульс атомов равнялся нулю.

Ранее проведенные исследования [3–6] показали, что при создании волн в расчетных ячейках, содержащих скопления межузельных атомов, они инициирует перестройку межузельных атомов в ориентированные по ходу распространения волны комплексы краудионов. Последующие волны могут вызывать смещения таких образований. Особенностью краудионных комплексов является их высокая стабильность. Подобные скопления межузельных атомов не распадаются на отдельные компоненты даже при температурах, близких к температуре плавления. Кроме того, под действием ударных волн они могут смещаться со сверхзвуковыми скоростями на достаточно большие расстояния. Особенностью данного режима движения является возможность безаннигиляционного преодоления комплексами одиночных вакансий, упругих полей кластеров вакансий, а также, при определенных условиях, малоугловых зернограницных областей, что делает их потенциальными переносчиками вещества вглубь материала при радиационном воздействии. В связи с этим краудионные комплексы могут рассматриваться в рамках ударной модели, объясняющей эффект дальнего действия.

Перейдем к рассмотрению процессов, лимитирующих подвижность краудионных комплексов. Рассматриваемые механизмы используются в теории дислокаций, но могут быть использованы при описании любого источника упругого поля [8]. Кроме того, краудионные комплексы могут рассматриваться как фрагменты дислокационных петель, следовательно, применяемый подход вполне оправдан. Краудионы в кристалле могут мигрировать из-за наличия напряжений в кристалле или, как показано в [6], в результате прохождения по кристаллу упругой волны. Для изучения процессов миграции комплексов в проводимых компьютерных экспериментах будем присваивать скорость непосредственно краудионам, а точнее группе атомов, образующих ядро краудионного комплекса. Необходимо отметить, что при движении краудиона в кристаллической решетке ему необходимо преодолевать барьеры Пайерлса – Набарро, связанные с периодическим строением кристалла. Данные потенциальные барьеры, разделяющие соседние равновесные положения краудиона, невелики, что позволяет ему легко смещаться вдоль плотноупакованных направлений. Упругая деформация, создаваемая центром краудиона, в основном затрагивает атомы того ряда, в котором он расположен, поэтому энергия активации миграции в данном плотноупакованном ряду мала. Медленно движущиеся краудионы преодолевают потенциальные барьеры с помощью термических флуктуаций. При увеличении скорости кинетическая энергия краудионов достигает высоты потенциальных барьеров, и происходит их динамическое преодоление. В данном случае

торможение краудиона осуществляется в результате оттока энергии к различным элементарным возбуждениям в кристалле. Так как атомы одиночного краудиона располагаются вдоль направления с минимальным периодом решетки, то допускается пренебрежение взаимодействием с соседними атомами по сравнению с взаимодействием между атомами, образующими краудион, но для краудионного комплекса, по-видимому, такое допущение не приемлемо. Движение комплекса в периодическом потенциале, связанном с дискретностью кристалла, приводит к изменению упругого поля, и, как следствие, к излучению фононов или упругих волн. Данный механизм получил название радиационного торможения. При высоких скоростях, когда кинетическая энергия краудионов значительно превосходит потенциальные барьеры, наличие периодического поля приводит к незначительным возмущениям равномерного движения комплекса, и радиационное трение убывает пропорционально квадрату скорости.

Попробуем выявить описанный выше механизм. На рисунке 1 показаны атомные смещения, вызываемые плоскими краудионными комплексами, движущимися с транс- и сверхзвуковой скоростью. Следует оговорить, что при построении изображения использовалась обрезка атомных смещений, поэтому наибольшие смещения, связанные с изменением положения самого комплекса, не показаны. Атомные смещения, представленные на рисунке 1, *а*, направлены не только перпендикулярно осям краудионов, но и в направлении их движения. Излучение фононов в данном направлении приводит к торможению комплекса. При сверхзвуковой стартовой скорости краудионов распределение атомных смещений в расчетной ячейке имеет конусообразную форму (см. рисунке, *б*), характерную для фронта ударной волны. При этом излучения фононов в плотноупакованном направлении значительно снижаются.



Атомные смещения, создаваемые плоским краудионным комплексом, имеющим начальную скорость  $v$  (а) и  $1,5 \cdot v$  (б), через 0,5 пс эксперимента. Масштаб

Подобный механизм торможения краудионного комплекса реализуется при наиболее низких температурах, когда вымораживаются фоновые эффекты. Повышение температуры приводит к появлению фоновых ветров, который обусловлен асимметрией потока фононов, рассеивающихся на динамическом краудионном комплексе. Импульс, передаваемый фононами краудионам, пропорционален их скорости и направлен в противоположную сторону движения комплекса. При возрастании температуры до дебаевской и выше, начинает проявляться эффект релаксации «медленных» фононов. Вклад данного механизма соизмерим с вкладом фоновых ветров.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Алалыкин А. С., Крылов П. Н., Шинкевич М. В. Эффект дальнего действия в полупроводниках // Вестник Удмуртского университета. 2005. № 4. С. 141–152.
2. Мартыненко Ю. В., Московкин П. Г. Эффект дальнего действия и перенос энергии в твердых телах при ионной бомбардировке // Неорганические материалы. 1998. Т. 34. № 9. С. 1142–1144.
3. Поведение краудионов и их комплексов в слабоустойчивом состоянии материалов / Маркидонов А. В. [и др.] // Известия ВУЗов. Физика. 2011. № 11. С. 61–67.
4. Механизмы трансформации краудионных комплексов при прохождении продольной волны / Маркидонов А. В. [и др.] // Нелинейный мир. 2011. Т. 9. № 12. С. 826–835.
5. Особенности динамики краудионов в кристаллах с ГЦК решеткой при различных силовых воздействиях / Маркидонов А. В. [и др.] // Химическая физика и мезоскопия. 2012. Т. 14. № 1. С. 46–54.
6. Маркидонов А. В., Старостенков М. Д. Радиационно-динамические процессы в ГЦК кристаллах, сопровождающиеся высокоскоростным массопереносом. Кемерово : Кузбассвуиздат, 2014. С. 191

7. Моделирование распространения ударных волн в нанобъектах методом молекулярной динамики (ВОЛНА). Маркидонов А. В. [и др.]. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2013661857 от 17.12.2013.
8. Альшиц В. И., Инденбом В. Л. Динамическое торможение дислокаций // Успехи физических наук. 1975. Т.115. Вып.1. С. 3–39.